ТАБИГЫЙ-МАТЕМАТИКАЛЫК ИЛИМДЕР

Чотонов Б.Б.

Поликристаллдык кремнийди суутектүү калыбына келтирүү учурунда аралашмалардын абалдарын Гиббстин эркин энергиясы аркылуу анализдөө

XXI кылымда өнүккөн технологиянын өзөгүн түзүүчүлөр микроэлектроникалык приборлор болуп эсептелинет. Ал эми микроэлектроникалык приборлор поли жана монокристаллдык кремнийден жасалат [1]. Поли жана монокристаллдык кремнийдин сапаттуулугу канчалык жакшы болсо, микроэлектроникалык прибордун иштөөсү ошончолук жогору болот [2]. Бул бүгүнкү күндөгү актуалдуу маселелерден болуп эсептелет. Ал эми поли жана монокристаллдык кремнийдин сапаттуулугун жогорулатуу дүйнөлүк проблемалардан экендигинде шек жок. Бул проблеманын үстүндө белсемдүү илимий изилдөөлөр жана тактоолор, сунуштар аз. Ошондуктан, бул проблеманын үстүндө изилдөөлөрдү жүргүзүп, жаңы илимий тактоолорду, жаңы илимий сунуштарды берип, өз билимимди өркүндөтүүгө аракеттендим.

Поликристаллдык кремнийдин сапаттуулугун жогорулатуу үчүн илимий изилдөөлөр ЖАК «Таш-Көмүр силикон продакшнз» заводунда жүргүзүлдү. Мында поликристаллдык кремнийди суутектүү калыбына келтирүү учурунда аралашмалардын эркин энрегияларын жогорку температураларда (1373 (К), 1423 (К), 1450 (К), 1475 (К), 1500 (К)) анализдеп чыгууга жетиштим [3]. Спектралдык анализ жүргүзүү менен поликристаллдык кремнийдин курамында кремнийден сырткары төмөндөгүдөй 14 аралашманын бар экендиги аныкталды [3]: Al, Fe, Mn, Pb, Sn, Cr, Ni, Ca, Cu, B, P, Sb, Zn. Бул алынган аралашмалардын жогорку температуралардагы эркин энергияларын аныктап, алынган Гиббстин эркин энергиясынын чоңдугуна карата анализ жүргүзүүгө болот. Изилдөөнүн негизги максаты болуп, аралашмалардын эркин энергиясынын чоңдугуна карата поликристаллдык кремнийге тийгизген оң жана терс таасирин аныктоо эсептелет.

Изилдөөгө коюлган маселени так анализдөө үчүн, төмөнкүдөй Гиббстин термодинамикалык теңдемесин колдонууга болот:

$$\Delta G=\Delta H-T\Delta S \qquad (1)$$

Мында, ΔH – системанын энтальпиясы, ΔS-системанын энтропиясы

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{298}^0 + \int_{298}^{T} C_P^0 dT \qquad (2)$$

$$\Delta S_T^0 = \Delta S_{298}^0 + \int_{298}^{T} C_P^0 / T dT \qquad (3)$$

$$C^0_p = a + bT + cT^{-2} \quad (4)$$

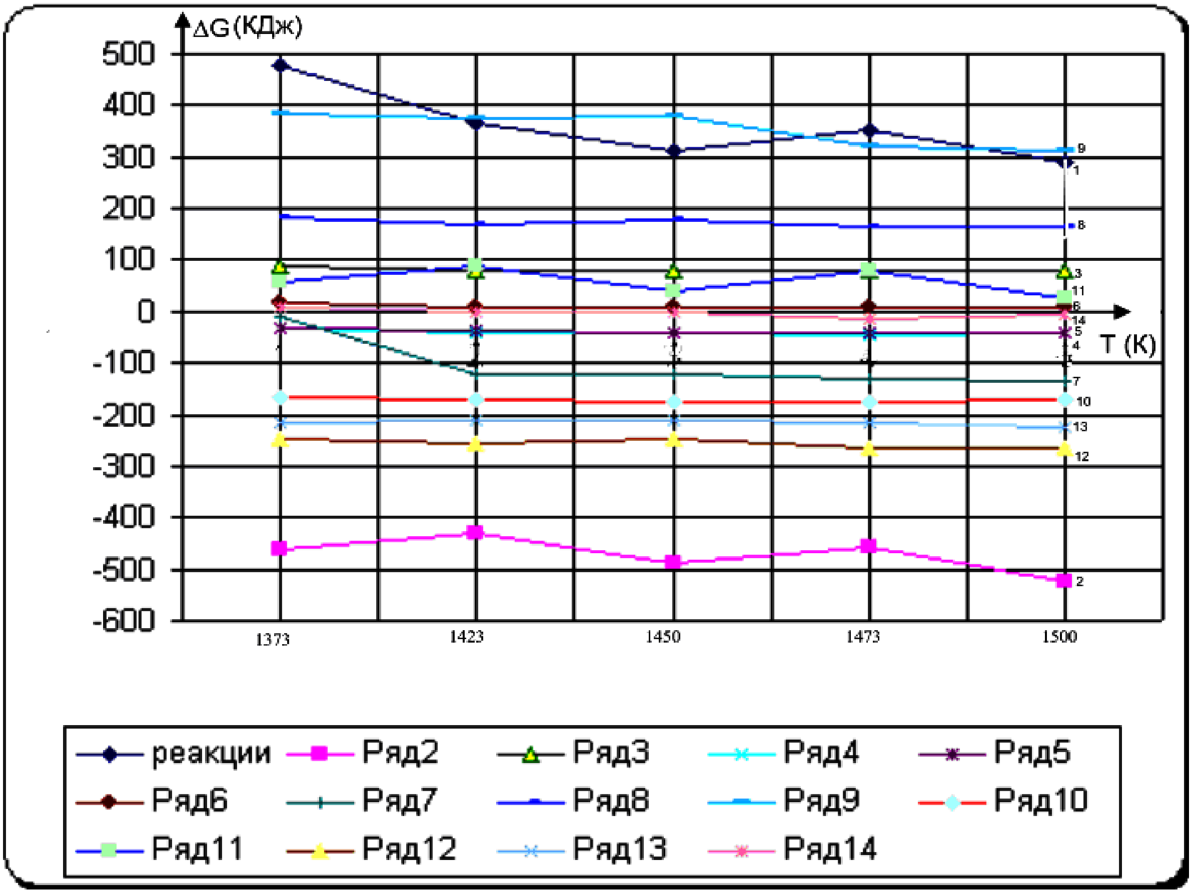
a,b,c – эмприкалык турактуулар, $b=10^{-3}$, $c=10^5$ [4]

Бул теңдемелерди колдонуп, андан алынган илимий изилдөөлөрдүн так мааниси төмөндөгү графиктер жана таблицалар түрүндө берилди:

Таблица 1. Тазалоонун суутектүү калыбына келтирүү учурунда Гиббстин эркин энергиясынын (ΔG) сан маанилери

№	Р е а к ц и я	1373 К	1423 К	1450 К	1473 К	1500 К

		ΔG КДж	ΔG КДж	ΔGКДж	ΔGКДж	*ΔGКДж*
1	$2AlCl_3 + 3H_2 \Leftrightarrow 2Al + 6HCl$	476,76	364,54	312,93	351,12	290,93
2	$2FeCl_3 + 3H_2 \Leftrightarrow 2Fe + 6HCl$	-461,96	-431,49	-490,21	-458,19	-525,53
3	$MnCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Mn + 2HCl$	87,57	80,37	81,06	80,76	79,06
4	$PbCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Pb + 2HCl$	-33,20	-40,23	-39,41	-46,38	-40,99
5	$SnCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Sn + 2HCl$	-33,67	-35,14	-39,16	-41,18	-41,09
6	$CrCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Cr + 2HCl$	15,93	8,27	8,80	7,32	6,53
7	$NiCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Ni + HCl$	-11,82	-120,06	-121,59	-130,04	-136,96
8	$TiCl_4 + 2H_2 \Leftrightarrow Ti + 4HC$	180,93	171,28	175,99	163,91	163,86
9	$CaCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Ca + 2HCl$	385,25	376,07	377,54	319,77	314,03
10	$CuCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Cu + 2HCl$	-165,06	-170,76	-174,22	-176,65	-169,18
11	$2BCl_3 + 3H_2 \Leftrightarrow 2B + 6HCl$	56,90	89,12	40,80	80,84	24,03
12	$2PCl_3 + 3H_2 \Leftrightarrow 2P + 6HCl$	-245,40	-255,74	-247,25	-264,44	-265,32
13	$2SbCl_3 + 3H_2 \Leftrightarrow 2Sb + 6HCl$	-216,30	-210,36	-210,80	-217,53	-222,78
14	$ZnCl_2 + H_2 \Leftrightarrow Zn + HCl$	6,35	0,55	-1,94	-13,5	-5,25



Гр. 1. Тазалоонун суутектүү калыбына келтирүү учурунда Гиббстин эркин энергиясынын температурадан болгон көз карандылык графиги

Алынган графикке карата төмөндөгүдөй илимий анализ жүргүзүүгө болот:

Поликристаллдык кремнийди суутектүү калыбына келтирүү учурунда аралашмалардын 42%зы [5] теориясына ылайык, $\Delta G>0$ болуу менен реакцияга кирбей, поликристаллдык кремнийдин калыбына келүүсүнө тоскоолдук кылган. Ошондой эле $\Delta G < 0$ мааниге ээ болгондо, системада реакция жүрөт, бирок аралашмалардын энергетикалык деңгээлине (ΔH) жана системанын энтропиясына (ΔS) карата эндотермикалык жана экзотермикалык реакцияны пайда кылат [6].

Бул теорияга ылайык поликристаллдык кремнийдин курамындагы жалпы аралашмалардын 58%зы реакцияга киришет. Реакцияга кирген аралашмалардын Cu жана P жылуулукту бөлүп чыгаруу менен өсүүчү экзотермикалык реакцияга киришет. Ал эми калган төмөнкү аралашмалар (Fe, Pb, Sn, Ni, Sb, Zn) температурасы жогорулаган сайын $T_2 \rightarrow T_1$ ге умтулуу менен жылуулукту жутуу аркылуу кемүүчү эндотермикалык реакцияга ээ болушат.

Жогорудагы аралашмалардын ичинен цинк (Zn) аралашмасы 1371(К) ден 1450(К) ге чейинки температураларда реакцияга кирбей, ал эми 1450(К) ден – 1500(К) дерде эндотермикалык реакцияга ээ болот.

Жыйынтык

1. Поликристаллдык кремнийди суутектүү калыбына келтирүү учурунда аралашмалардын 42%ы реакцияга кирбей поликристаллдык кремнийдин (Si) сапаттуулугуна терс таасирин тийгизген.
2. Жалпы аралашмалардын 58%ы реакцияга киришип, анын ичинен Cu жана P аралашмалары $T_1 \rightarrow T_2$ ге умтулуу менен экзотермикалык реакцияга ээ болушкан. Ошондой эле 1473 (К) ден 1500 (К) температурада эркин энергиясы жогору болуп, поликристаллдык кремнийдин сапаттуулугуна белгилүү бир өлчөмдө терс таасирин тийгизгендиктен, аларды оор тазалануучу аралашмалар деп айтабыз.
3. Төмөндөгү аралашмалар (Fe, Pb, Sn, Ni, Sb) эндотермикалык реакцияга кирип, алар жогорудагы температураларда $T_2 \rightarrow T_1$ ге умтулуу менен баштапкы температурада 1373 (К) де тазаланууга дуушар болуп, кремнийдин сапаттуулугуна оң таасирин берген.
4. Цинк (Zn) аралашмасы 1373 (К) ден 1450 (К) ге чейинки температураларда реакцияга кирбей, ал эми 1450 (К) ден – 1500 (К) температура интервалында эндотермикалык реакцияга кирген.
5. Поликристаллдык кремнийди суутектүү калыбына келтирүү учурунда жалпы аралашмалардын 58%ы тазаланып, поликристаллдык кремнийдин сапаттуулугуна оң таасирин берсе, ал эми аралашмалардын 42%ы реакцияга кирбей поликристаллдык кремнийдин сапаттуулугуна терс таасирин тийгизген.

Адабияттар

1. *Кудайбергенов Т.Т., Рысмендиев К.Р., Асанов У.У.* Жалпы химия жана элементтердин химиясы. Бишкек.: 1994. 3-254 б.
2. *Медведов С.А.* Введение в технологию полупроводниковых материалов. -М.: Высшая школа, 1970. 292-398, 405-449-б.
3. *Ормонт В.Ф.* Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. -М.: высшая школа, 1968. 3-200-б.
4. *Рохов Е.Д.* Мир кремния. –М.: Химия, 1990. -152-б
5. *Угай Я.А.* Введение в химию полупроводников. –М.: Высшая школа, 1975. 9-292-б.
6. *Чотонов Б.Б.* Исследование термодинамических процессов очистки кремния и разработка системы контроля его качества: -дис.… канд.физ.-мат.наук: 01.04.10. – Андижан, 2002.-127 б.